



TITLE:

モンテカルロ法によって高密度近藤状態を調べる(Anderson Modelの厳密解とその応用に関する理論的研究,科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

斯波, 弘行

CITATION:

斯波, 弘行. モンテカルロ法によって高密度近藤状態を調べる (Anderson Modelの厳密解とその応用に関する理論的研究,科研費研究会報告). 物性研究 1986, 45(5): 18-22

ISSUE DATE:

1986-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91884>

RIGHT:

モンテカルロ法によって高密度近藤状態を調べる

東大 物性研究所 斯波弘行

高密度近藤状態は電子間に強い相関のある フルミニ流体 と想像されている。その状態を変分法とモンテカルロ法を組み合わせたことによって調べているので 今迄に得られている結果をみる。

一般に強い電子相関のある多電子系は 困難な理論的課題である。相関の弱い場合の摂動論によって取り扱うことが可能だが、強い場合には近似理論としては変分法が有力である。しかし、その変分理論すら容易でない。よく知られた Hubbard モデルに対しては Gutzwiller 理論¹⁾ が最も注目すべき変分理論であるが、エネルギー期待値の計算には非常に問題がある。

事實上、高密度近藤状態についてもみてはまる。ここでも変分理論は満足すべき水準に達していない。我々は両者共モンテカルロ法によってある程度克服出来ると考えて現在計算を進めている。²⁾ 以下の話はその中間報告である。

高密度近藤状態を調べる最も簡単なモデルとして $U \rightarrow \infty$ a single-orbital periodic Anderson model とする。それに対する変分理論は Stevens,³⁾ Brandow⁴⁾, Rice-Ueda⁵⁾ により提出されていゝ。その変分波動関数は single impurity problem の Yosida 理論の第一近似に相当する Varma-Yafet の自然な拡張で

$$\Psi = \prod_j [1 + \sum_{\sigma} f_{j\sigma}^{\dagger} \tilde{c}_{j\sigma}] |F\rangle \quad (1)$$

$$\tilde{c}_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik \cdot R_j} \Gamma_k c_{k\sigma}$$

で Γ_k は site j のまわりの bound state の cloud (== 穴) を記述する。エネルギーを最小にするよう Γ_k を決めるのが変分問題である。³⁾ (1) は定数と別にして

$$\Psi = \hat{P} \prod_k^{k < k_F} \prod_{\sigma} [\cos \phi_k c_{k\sigma}^{\dagger} + \sin \phi_k f_{k\sigma}^{\dagger}] |vacuum\rangle \quad (2)$$

と書ける。⁵⁾ $\hat{P} = \prod_j (1 - n_{j\uparrow} n_{j\downarrow})$ である。(2) は Gutzwiller 型である。

モンテカルロ法で変分計算を行い、物理量の期待値を行うには第一量子化の表示で (2) の Ψ を書き実行する。⁶⁾ E を最小にする Γ_k の k 依存性を決める計算も進めつつあるが、これから示すものはより簡単に 2つのパラメーターを含む式で Γ_k を表わしそのパラメーターを変分で決めた計算である。電子相関がないとき Γ_k は単純に s, f の混成バンドの f, s 成分比になり、それは f レベルの位置 E_f と混成の大きさ V で表

わさ水子. そにて電子相対入ったと30 E_f , V の代りにくり込まれた他 \tilde{E}_f , \tilde{V} と代入し, 二の \tilde{E}_f , \tilde{V} を変分パラメーターとする. correlation factor \hat{F} は変分モンテカルル法より正確に取り扱ふことが出来る. モンテカルル計算は有限系で実行する. 系の大さは計算時間が電子数に3乗に比例することから上限がせいぜい現実的には200程度と予想される. (以下計算はより小さい系に対するものである)

今回示す計算はモデルとして一次元モデルをとり, 伝導電子帯の中は-2から2まで(全バンド幅=4), V を0.5 ととり, E_f を0, -1, -1.5 とかえてみた. 原子数 N_a は40で電子濃度 $= N_e/N_a = 2$, $7/4$ と選んでいる.

E を最小にする変分パラメーターの値

E を最小にする $\tilde{E}_f - \tilde{V}$ の値は以下通りである. ($N_e=70$, $N_a=40$ に対して)

E_f	0	-1	-1.5
\tilde{E}_f	~ 0.05	~ -0.8	~ -1.0
\tilde{V}	~ 0.4	~ 0.2	~ 0.1
η_f	0.64	0.87	0.93

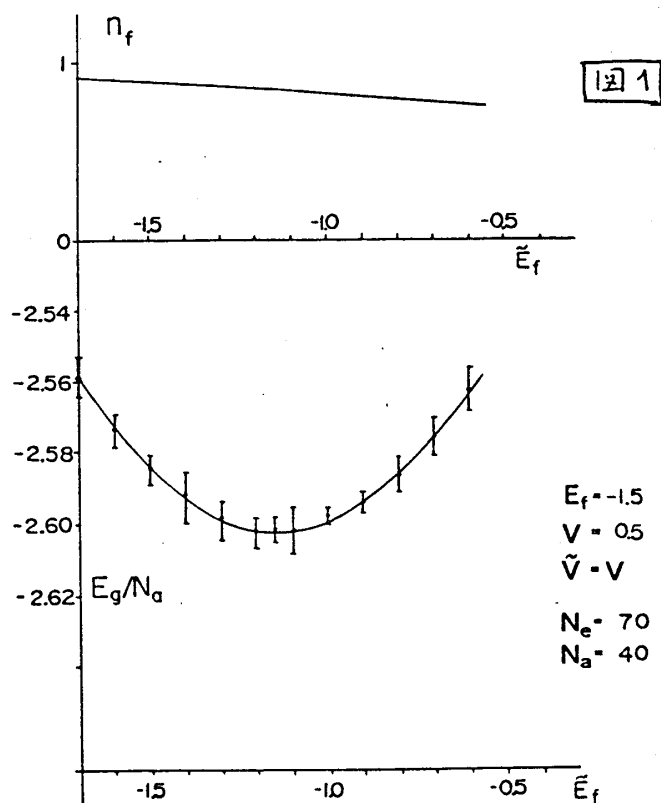
即ち \tilde{V} は元々 $V=0.5$ より小さくなる. \tilde{E}_f (有効f準位) は E_f より高くなる. η_f はそのときのf電子数の平均である.

図1は E の変分パラメーターと共に変わる原子数に二で $\tilde{V} = V$ ととり \tilde{E}_f をかえていく. 変分モンテカルル法では統計誤差を伴うためこの図で明らかになる E を最小にする \tilde{V} , \tilde{E}_f を「正確に」決めるには若干の困難がある. 上の表に \sim がついているのはその為である.

基底状態の性質

変分パラメーターが決まればそれを含む波動関数で物理量の期待値を計算すればよい. この段階でモンテカルル法による実行出来る.

(1) 運動量分布



s 電子, f 電子の運動量分布を計算したのが図 2, 3 である。図 2 は $N_e = 2N_a$ の場合で、このとき系は insulator と思われ、 $E_f = 0.0$ に対する結果である。f 電子の運動量分布は電子相関が強いときは k の 0 付近で 0 に近く、 $k \sim \pi$ 付近で 1 に近い。電子相関により k 依存性が小さくなっている。つまり f 電子は電子相関により局在性が増している。 $N_e/N_a = 7/4$ に対する結果は図 3 であるが、この場合系は metal の metal 特有のフェルミ準位で n と \bar{n} が存在する。f 電子の分布は k の小さい n のフェルミ準位と \bar{n} のフェルミ準位とで分断されている。

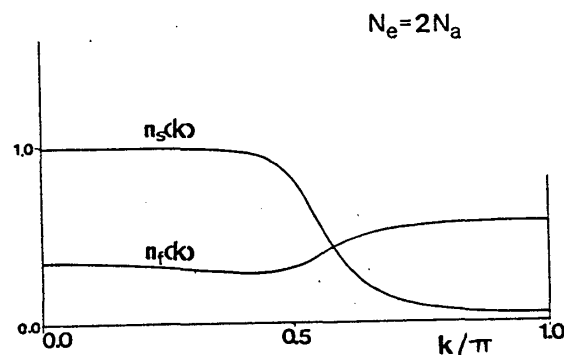


図 2

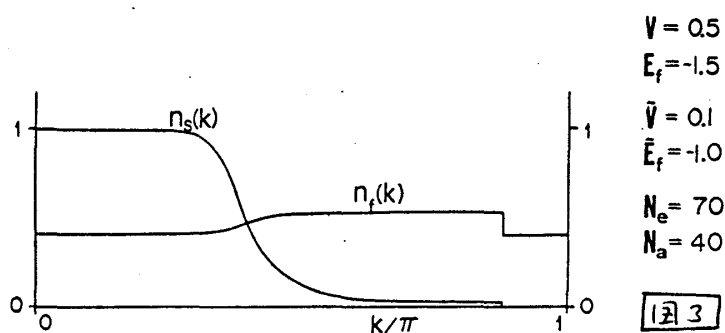


図 3

(2) スピン相関関数

基底状態でのスピン相関関数はスピン相関関数のフーリエ変換 (magnetic structure factor) を s, f にわけて計算して見たのが図 4, 5 である。図 4 は ff の f -スピンの同士のスピン相関関数、 fs は f -スピンの s -スピンの同士の、 ss は s -スピンの同士のスピン相関関数である。この図でスピン相関が局所的であるか q 依存性があるかを示している。この図で ff の相関が q 依存性がないかを示している。これは筆者にとって全く予想外であった。強く想像されているような single impurity のふるまいが成り立っている。これは ff の q 依存性がないためである。これは f 電子間の intensity correlation のある程度あることを示している。これは ff の (1) 対称性関数で cloud が overlap していることを示している。これは q 依存性の強弱は別として、ある程度真実である。今考えている。 fs の方は f -spin と s -spin の同士の逆相関がある。 fs の方が余り q の依存性がない。これはその相関が局所的であることを示す。図 4 は $N_e = 2N_a$ に対するもので、このとき f -スピンの同士の反発性の相関がある。 ff の q の依存性がある。図 5 は $N_e/N_a = 7/4$ の図 3 に対応する場合で q の途中の ff の q の依存性がある。これは ff の q の依存性について今後更に検討して見ようとしている。 Γ_k の k 依存性が反映していると思われる。という q の相関

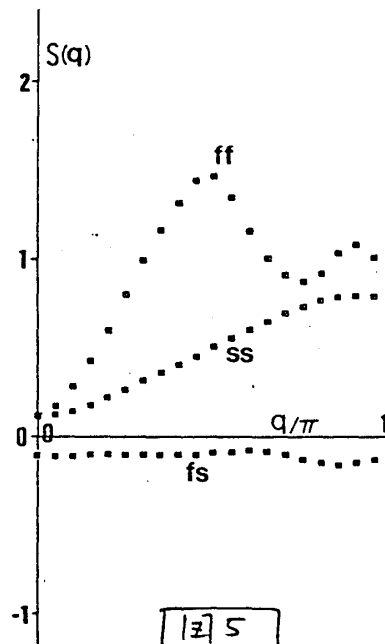
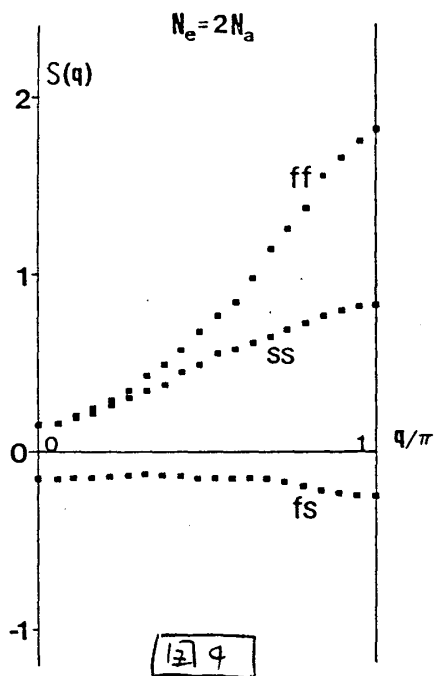
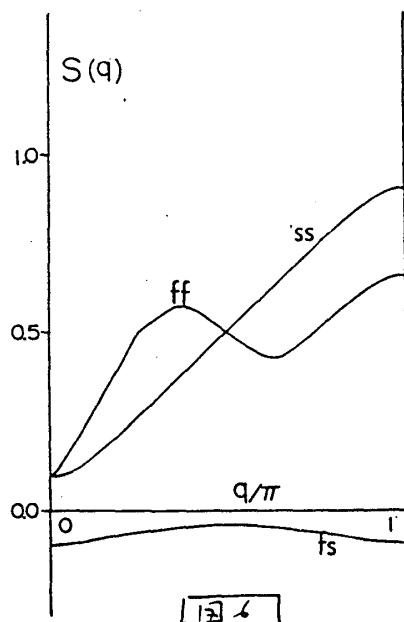


図 4 の計算結果と図 6 の結果を比較すると、 ff の値が図 5 と比べて大きく増大しているからである。

まとめと今後の課題

1. ニニで変分モンテカルロ法で高濃度近藤状態、特に singlet bound state の cloud の重なり処理がどの程度できることを示した。
2. 物理的結果としては、基底状態でのスピン相関がかなり強いことがわかった。これは新しい結果であると思う。
3. 今後に残された問題は沢山あり、これからひたつぎ努力をしていく必要がある。特に、今迄の結果をよりきちんとしたものにすること。
4. そしてモデルを本邦の近藤現象の近似的なモデルとして、3次元、orbital degeneracy etc.
5. 7-パラメータで決めること
6. 変分法初稿と (1) から更に進めて改良すること。
現在 2 次元の計算を目標として計算を行っている。特に、ニニの進め方を



s-f exchange model (Kondo lattice) に用いた。一応予備的結果から
はかっている。スピン-スピン相互作用で表わした。

文献

- (1) M. C. Gutzwiller: Phys. Rev. Lett. 10, 159 (1963)
- (2) ここに述べた 変分モンテカルロ法は Hubbard モデルの Gutzwiller 理論の検討
及び改良の便に。現在計算の進行中。横山寿敏, 斯波弘行: 準備中。
- (3) K. W. H. Stevens: in Valence Fluctuations in Solids (Falicov-Hanke
- Maple)
- (4) B. H. Brandow: preprint (1985).
- (5) T. M. Rice and K. Ueda: Phys. Rev. Lett.
- (6) W. L. McMillan: Phys. Rev. 138, A442 (1965)